

Boher 等简单地用德拜-瓦勒因子处理界面粗糙度问题。引入 σ_R 作为表征界面粗糙度的参数, 则粗糙界面的反射系数 X 等于完整界面的反射系数 X_0 乘以一个衰减因子:

$$X = X_0[-8\pi^2\sigma_R^2(\sin^2\theta/\lambda^2)]. \quad (12)$$

Boher 等人的研究工作发现, 除了考虑上述物理粗糙以外, 还必须同时考虑互扩散界面的存在和 C 层厚度沿堆垛方向的漂移, 才能正确地对待射曲线进行模拟(图 4)。

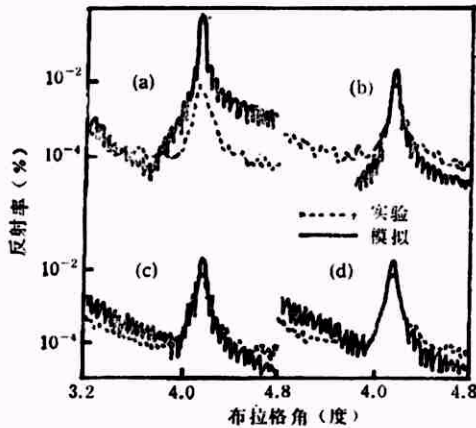


图 4 C/W 纳米多层膜第三布拉格峰附近的实验和模拟曲线[其模拟参数为: (a) 无漂移、无扩散、无粗糙 ($d_w = 12.3 \text{ \AA}$, $d_c = 19.7 \text{ \AA}$), (b) 无漂移、无扩散, $\sigma_R = 3.1 \text{ \AA}$ ($d_w = 12.3 \text{ \AA}$, $d_c = 19.7 \text{ \AA}$), (c) 无漂移, 4 \AA 扩散层, $\sigma_R = 3.1 \text{ \AA}$ ($d_w = 10.3 \text{ \AA}$, $d_c = 17.7 \text{ \AA}$), (d) 完全模拟: $d_w = 10.3 \text{ \AA}$, 4 \AA 扩散层, $d_c = 17.7 \text{ \AA} \pm 0.35 \text{ \AA}$, $\sigma_R = 3.1 \text{ \AA}$]

6. 界面缺陷的掠入射反射图像分析

界面缺陷除了前面所述的界面粗糙、扩散外, 还可能其他类型的缺陷。例如, 界面弛豫有时伴随着位错的出现。各种缺陷能引起晶格

畸变, 因而能够利用 X 射线形貌术^[12]的衍射衬度予以揭示。但是, 常规的对称反射形貌难以给出薄膜和界面的可观衬度。如果利用掠入射双晶反射形貌技术, 则有时能拍摄到薄膜和界面的衍射衬度, 同时由于分辨率的提高, 甚至于可能分层拍摄形貌照片。掠入射形貌应采用 CG 模式。实验技术上的困难之一是有时会找不到某一波长下合适的反射面, 以便形成掠入射条件。同步辐射的波长可调, 使得样品的某种非对称反射而满足掠入射条件(入射 X 射线同样品表面的夹角接近 ϕ_0), 从而给出增强的表面或界面的衍射图像。

Green 等^[13]利用掠入射同步辐射单色光形貌术和双晶衍射, 观察了 InGaAs/GaAs 薄膜中失配位错的成核问题。发现薄膜厚度从 17 nm 增加到 18 nm 时, 失配位错显著增加, 从而确定 17 nm 是该应力外延膜的临界厚度。

[1] W. C. Marra et al., *J. Appl. Phys.*, 50(1979), 6927.
 [2] A. M. Afanasev and O. G. Mclikyan, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 122(1990), 459.
 [3] S. F. Cui, et al., *Rev. Sci. Instrum.*, 62(1991), 2419.
 [4] H. Dosch et al., *Phys. Rev. Lett.*, 56(1986), 1144
 [5] S. Brennan, *Surf. Sci.*, 152/153(1985), 1.
 [6] S. Brennan et al., *Phys. Rev. B*, 33(1986), 3678.
 [7] G. H. Vineyard, *Phys. Rev. B*, 26(1982), 4146.
 [8] Z. H. Mai et al., *Phys. Rev. B*, 41(1990), 9930.
 [9] J. Mizuki et al., *NEC Res. Devel.*, 32(1991), 8.
 [10] S. F. Cui et al., *Modern Phys. Lett. B*, 5(1991), 1591.
 [11] P. Boher et al., *J. Appl. Phys.*, 68(1990), 6133.
 [12] 许顺生、冯端编著, X 射线 貌相学, 科学出版社, (1987) 138.
 [13] G. S. Green et al., *Philos. Mag. Lett.*, 62(1990), 131.

逾渗现象——一种随机分形

杨 进

(四川师范大学固体物理研究所, 成都 610066)

回顾了逾渗现象研究的一些主要工作, 叙述了该领域的一些研究进展, 着重介绍了逾渗现象中的分形、分维与分形子的一些基本概念, 物理思想和研究方法。

逾渗 (percolation) 概念是由布罗德本特 (S. K. Broadbent) 和哈梅斯利 (J. M. Ham-

mersley) 于 1957 年首先提出的。它是描述流体在随机介质(多孔介质)中运动的一个数学模

型,本质上属于概率论的一个分支。

自然界有着丰富多彩的逾渗现象。在人体和动物体内,有许多不同类型的多孔介质,如人体的肺、肾、心和肝,植物的根、茎、枝、叶等都是多孔介质,因而,其中的流体运动亦属于逾渗。逾渗与通常的随机过程(如扩散过程)不同之处在于,流体运动本身不具有随机性,而是介质具有随机性。

研究逾渗的重要性在于:其一是由于逾渗的理论 with 实验结果间有分歧。其二是逾渗与临界现象非常类似。以磁系统与逾渗模型为例来说明。逾渗中的 P (占据率)与磁系统中的 T (温度)相当;逾渗中的 P_c 量表示坐标原点属于无限大集团的几率,该量在逾渗模型中起着序参量的作用,和磁系统中序参量 M (磁化强度)相当。对逾渗模型同样存在着类似的临界指数规律(标度律)。磁系统与逾渗模型中的临界指数值均与维数有关,但两者又有一些区别。对热力学系统,平均场理论对应的是 d (欧氏维数) = 4 以上的系统,而在逾渗中平均场理论对应的是 $d = 6$ 以上的系统。其三是逾渗模型本身有非常广泛的实用价值。逾渗理论所研究的是联接性问题。在自然界中有许多系统的联接性质与系统内部的物理参数有重要关系。例如,近年来非常活跃的稀释磁系统,聚合物凝胶,某些无序系统的金属-绝缘体相变等都直接与逾渗模型有关。

一、临界现象与逾渗

1. 逾渗的临界现象

为了说明逾渗的产生,我们先看一个直观例子。设有一块足够大的网格,其形状类似于常见的纱窗,由导电的金属棒与不导电的塑料棒组成。设金属棒所占比例为 P ,则塑料棒所占的比例为 $(1 - P)$ 。当 $P = 0.2$ 时,网格中金属棒之间可连成为一些非常小有限大小集团,故电流无法通过。当 $P = 0.4$ 时,仍无电流通过,但其内部微观结构(集团大小)发生变化。当 $P = 0.6$ 时,电流可通过了,这是因为

金属棒成分的增加,在网格上形成了导电集团。该集团是一个分形结构。显然, P 在 0.4—0.6 之间有一个值,在该值处网格由不导电变成导电,此值称为临界值或逾渗阈值,用 P_c 表示。

设 σ 为导电率。在 $P < P_c$ 时,只有有限大小的导电集团存在,此时 $\sigma = 0$; 在 $P > P_c$ 时,除了有限大小的集团外,还有一个无限大的集团存在,此时 $\sigma \neq 0$ 。可以用一个指数函数来表示 $\sigma \propto |\varepsilon|^t$, t 称为导电指数。 ε 的定义为

$$|\varepsilon| = \frac{P - P_c}{P_c}$$

在临界值 P_c 处,导电性发生突变的现象称为逾渗的临界现象,也称“联接性相变”。逾渗理论的核心问题是联接性问题,即研究流体的导通,流过。

逾渗模型有三种: 点(site)逾渗,键

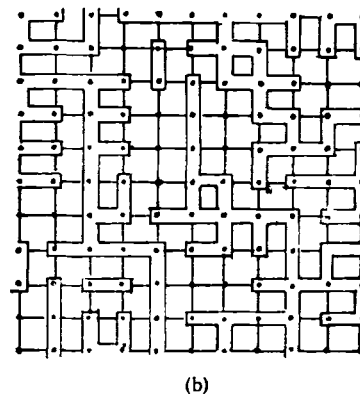
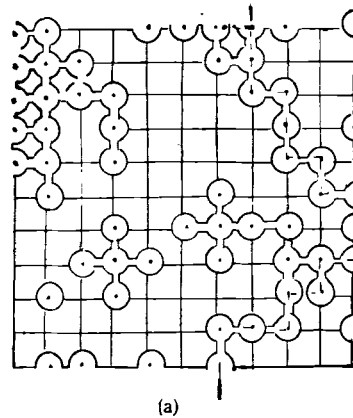


图1 点阵上的逾渗
(a) 点逾渗模型(有逾渗途径); (b) 键逾渗模型
(无穿过该方块的逾渗途径)

(bond) 逾渗和点键混合逾渗模型。点逾渗考虑的是格点是否被占据,即格点是“空”还是“实”,或是“开”还是“关”;键逾渗则是考虑格点间的连线是否被占据,即键是“开”还是“关”。实际研究中运用最多的还是点逾渗。

2. 一些常见点阵的逾流现象

图 2 给出了几种最基本的二维点阵、三角形、正方形、卡哥麦 (Kagome)、蜂房形及贝塞尔 (Bethe) 点阵的一部分。所有这些都是规则的点阵。每一点阵都有相同的配位数 Z , 都具有极对称的结构。正是由于这些点阵具有高度的对称性和简单性,因而可求出其阈值的精确值,见表 1 所示。

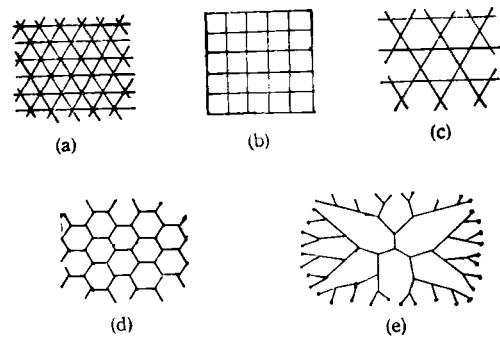


图 2 五种二维点阵

(a) 三角形, $Z = 6$; (b) 正方形, $Z = 4$; (c) 卡哥麦, $Z = 4$; (d) 蜂房形, $Z = 3$; (e) 贝塞尔点阵, $Z = 3$

逾渗理论中的一个基本定理是,当 $P < P_c$

表 1 不同点阵上点逾渗和键逾渗的阈值

维数 d	点阵类型	配位数 Z	堆积分数 η	逾渗阈值		临界键数 ZP_c^b	临界体积分数 ηP_c^b
				P_c^b	P_c^s		
1	线	2	1	1	1	2	1
2	三角形	6	0.9069	0.3473	0.50000	2.08	0.45
2	正方形	4	0.7854	0.50000	0.5930	2.00	0.47
2	卡哥麦	4	0.6802	0.45	0.6527	1.80	0.44
2	蜂房形	3	0.6046	0.6527	0.698	1.96	0.42
3	面心立方	12	0.7405	0.119	0.198	1.43	0.147
3	体心立方	8	0.6802	0.179	0.245	1.43	0.167
3	简单立方	6	0.5236	0.247	0.311	1.48	0.163
3	金刚石	4	0.3401	0.388	0.428	1.55	0.146
4	简单立方	8	0.3084	0.160	0.197	1.30	0.061
4	面心立方	24	0.6169	—	0.098	—	0.060
5	简单立方	10	0.1645	0.118	0.141	1.2	0.023
5	面心立方	40	0.4653	—	0.054	—	0.025
6	简单立方	12	0.0807	0.094	0.107	1.1	0.009

时,逾渗概率 $Q(P) = 0$ 。临界值 P_c 反映了点阵的特征。对于给定的点阵,点逾渗的 P_c^s 和键逾渗的 P_c^b 通常不相同,并且有 $P_c^b < P_c^s$, 说明键逾渗比点逾渗易发生。为说明其原因,可考虑图 2 中正方形点阵。在此点阵上,一个点阵点有四个相邻的点,而一条键却连着六条相邻的键。一般而言,当一个点阵点有 Z 个最近邻点时,一条键则有 $2(Z - 1)$ 条最近邻键。因此,对于一个确定的点阵,键过程比点过程有更多的联接机会,这就是为什么键逾渗比点逾渗更容易发生的缘故。

由表 1 中可发现有一个简单的经验关系:

$$ZP_c^b \approx d/(d - 1),$$

其中 d 为欧氏维数。该式说明键逾渗的阈值与配位数 Z 成反比。由上式可知,在规则的三(或二)维点阵上,如某点阵点的交联能力大于 1.5 (或 2),那么就出现键逾渗现象。同样,由表 1 可知,临界体积分数 ηP_c^b 对所有维数相同的点阵几乎是同一常数。它表明,在规则的二(或三)维点阵上,如“流体”占据了点阵总体积的 45% (或 15%) 左右,那么就出现点逾渗现象。

逾渗理论的具体应用,需知道概率 $Q(P)$

的行为(函数关系)。对于真实的点阵,给出 $Q(P)$ 的行为是一件极为艰难的事,一般采用蒙特-卡罗模拟法 (Monte-Carlo simulation) 来研究。图 3 给出了几种点阵的点逾渗概率函数关系。曲线 1 为面心立方 (fcc) 和六角形密堆积 (hcp); 曲线 2 为简单立方体; 曲线 3 为三角形; 曲线 4 为四面体(金刚石); 曲线 5 为正方形; 曲线 6 为六面体, 曲线 7 为定向平面点阵。

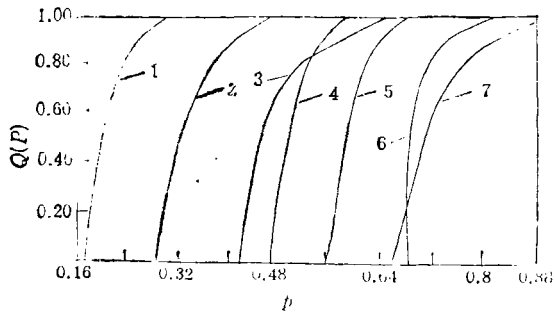


图 3 几种点阵的点逾渗概率函数关系

二、逾渗的标度理论

对逾渗模型的研究与热力学临界现象一样,也采用标度理论与位置(或动量)空间的重正化群两种方法^[1]。

逾渗模型的标度理论其中最为重要的是两个概念。一个是“鬼场”(ghost field)概念,一个是逾渗与热力学函数间的关系。逾渗模型的标度理论给出了临界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \eta, \nu, \delta$ 与标度幂 a_u, a_ε 的关系,如 $2-\alpha = \frac{1-a_u}{a_\varepsilon}$, $\beta = \frac{1-2a_u}{a_\varepsilon}$, $\gamma = \frac{3a_u-1}{a_\varepsilon}$ 等。

Kesten^[2] 证明了二维逾渗模型临界指数之间的关系为

$$\beta = \frac{2\nu}{\delta+1}, \quad \gamma = \frac{2\nu(\delta-1)}{\delta+1},$$

$$\eta = \frac{4}{\delta+1}, \quad \Delta = 2\nu - \frac{\delta}{\delta+1}.$$

标度理论本身并不能确定标度幂 a_u, a_ε 。重正化群理论提供了从微观上计算 a_u 和 a_ε 的

方法,从而可计算所有的临界指数。这时必须引入“ h ”场,又称“鬼场”。“ h 鬼场”就是随机场,“鬼”就是随机行走者。 h 的意义是每个格点上的平均“鬼数”。类似于磁系统中的磁场强度 H 。重正化方法的基本思想是:找出网格格点的占据几率 P 和“鬼场 h ”与 Kadanoff 原胞的占据几率 P' 和“鬼场 h' ”之间的递推关系,确定重正化群变换的不稳定不动点 (P^*, h^*) , 然后求得 a_u 和 a_ε 。实际上,对较大的 Kadanoff 集团,可由计算机给出蒙特-卡罗 (Monte-Carlo) 近似结果。

三、逾渗现象中的分形、分维与分形子

在临界点上,弯弯曲曲的逾渗集团图形具有无规自相似的特征。它们的自相似性是通过大量的统计而抽象出来的。而当逾渗连接性概率 P 与临界点有很小的偏差时,又在 $r < \zeta$ (关联长度)的尺度范围内显示出自相似的特征,故 ζ 亦可看成逾渗的特征长度。我们知道,当 $P > P_c$ 时,逾渗网格为分形结构。它具有自相似性分形 (self-similarity fractal) 和无标度性 (scaling)。因此, $Q(P)$ 的行为表征了逾渗随机分形的特征。无标度性与自相似性波

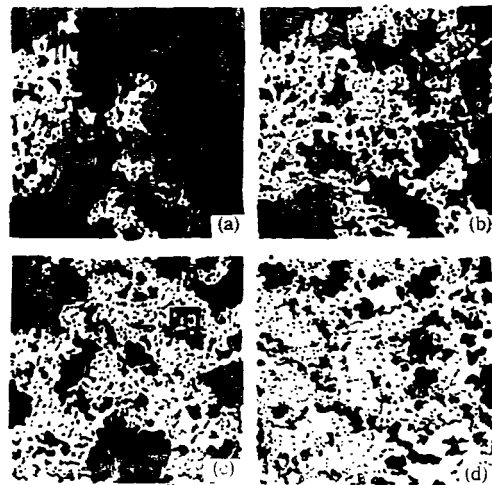


图 4 点阵上逾渗集团的形成 ($P_c = 0.5928$)
(a) $P = 0.59$, 未形成逾渗集团; (b) $P = 0.593$, 逾渗形成(白色集团); (c) 是图(b)小框的放大; (d) 是图(c)小框的放大

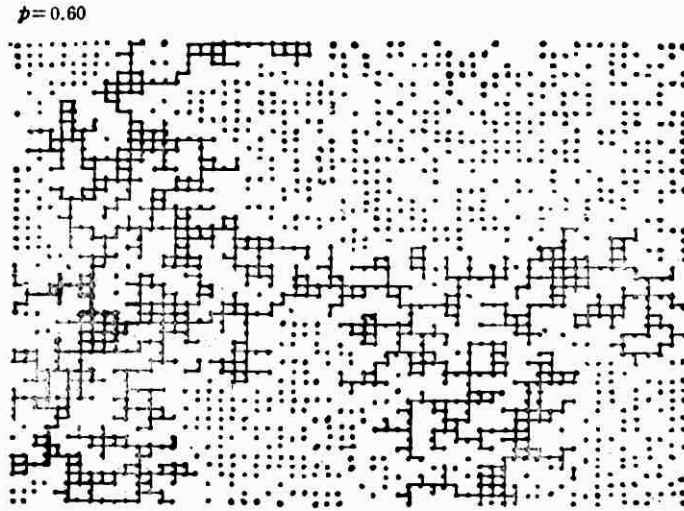


图5 $P = 0.60$ 时点逾渗的计算机模拟图

此是一致的。自相似只存在于所谓“无标度区间”之内，一旦逾越这个区间，自相似性就不复存在，自然也就谈不上分形了。图4给出了点阵上逾渗集团的形成，直观地说明了自相似特征。图5给出了点逾渗的计算机模拟图形^[3]。

具有分形结构的逾渗系统的定量描述需计算出其分维 (fractal dimension) 和逾渗指数。表2给出了不同欧几里德维数 d 情形下的分维值 D 和 ν 。

表2 逾渗网格的分维值

d	1	2	3	4	5	6
D	1	1.9	2.5	3.3	3.8	4
ν	1	1.35 ± 0.05	—	0.64 ± 0.02	0.51 ± 0.05	0.5

在考虑电流在逾渗网络上流动的问题时，得到的网格称逾渗骨架 (backbone of percolation network)。逾渗骨架是逾渗网络结构中对电流分布起作用的部分，在临界点附近它也是一个分形结构。逾渗骨架的分维比其原网格的要小，具体结果为： $D' = 1.6$ (2维)， $D' = 2.0$ (3维)。

谢尔宾斯基篮子的分支结构是逾渗中主干集团的较好近似模型，而在逾渗理论中，主干集

物理

团对相变起主导作用。在二维情况下，谢尔宾斯基篮子的分维数与逾渗主干集团的分维数 1.6 非常接近。

在逾渗阈值处，考虑无限大逾渗集团分形振动性质，其分形结构上的元激发 (elementary excitation)，即分形子 (fracton)，其意义类似于量子 (quantum) 和声子 (phonon)。其谱维数可表示为

$$\tilde{D} = \frac{2D_f}{2 + D_f + (\nu/\nu) - d}$$

其中 ν 是关联长度指数， ν 是电导指数， D_f 是分形维 (或称豪斯道夫维数)。 D_f 描写了几何对象的质量与其尺度的关系 (几何行为)，而 \tilde{D} 描写了分形在低频率下的态密度 (拓扑) 行为。分形子概念在无定态材料研究中有着重要的应用，可以说明许多振动、热和电现象。

四、逾渗与凝胶化

凝胶同生命现象和工业生产有着密切的联系。即使在今天，凝胶的分形仍是一个很有吸引力的研究课题。体型缩聚反应进行的程度以 P 表示。当达到某一程度 P_c 时，反应系统的粘度突然增加，并且出现具有弹性的凝胶，这种现象叫做凝胶化 (gelation)。此时的 P_c 值就是

凝胶点, 相当于逾渗发生的阈值, 凝胶化相当于临界现象。大分子凝胶是一个巨大的网络结构, 其凝胶的形成和结构同逾渗很相似。如果体型缩聚反应体系中没有溶剂存在, 那么凝胶化问题可用点逾渗模型来研究。如考虑了有溶剂分子更为真实的凝胶化则应当采用“点-键逾渗模型”来处理。表 3 给出了逾渗与凝胶化之间的关系。

表 3 逾渗与凝胶化的比较

逾 渗	凝 胶 化
逾渗阈值	凝胶点
联通	关联键
键联结性概率 P	形成交联键的百分率(反应度)
有限集团	溶胶分子
平均集团大小	平均分子量
无穷大集团	凝胶巨型分子
逾渗概率 Q	凝胶百分率 G
配位数 Z	官能团数 Z
电阻网络电导率	弹性剪切模量
Bethe 点阵近似	FS 理论

总之, 在逾渗理论中还有许多研究工作可做。因为逾渗理论还是一个新领域, 对许多问题有很不相同的观点和看法, 并没有统一的认识。人们可以用逾渗理论中得出的结果来检验热力学系统中求出的结果是否正确, 另外还可用逾渗理论中求出的新结果来检查热力学系统中是否也存在着这些结果。二维逾渗有许多实验依据, 合金薄膜的结构相变就是一例^[4]。逾渗集团产生于这个相变过程中。实验中用透射电子显微镜观察到的逾渗集团的半径的典型

大小为 1 mm。随机分形逾渗系统的电导的临界现象和弹性问题的临界现象是否属于同一普适类, 仍使人们感兴趣。实际的逾渗模型是三维的, 而采用动量空间重正化于逾渗模型, 得到的上界维数 (upper marginal dimension) d_+ 不是四维而是六维。这里 $d_+ = 6$ 太大也是一个问题。最近, 有人研究了次近邻的一维, 二维逾渗模型, 其结果表明考虑次近邻的逾渗问题与仅考虑最近邻的逾渗问题属于不同的普适类^[5,6]。姚凯伦等人研究了分形格子的逾渗问题^[7]以及逾渗在超导中的应用^[8,9]。由于计算机的高速运算能力和大存储量, 计算机已被广泛地用于逾渗模型的计算和其现象的模拟。逾渗现象与分形和分维学科正相伴而行。目前有关逾渗的论文报告层出不穷。美国物理学家约翰·惠勒 (J. A. Wheeler) 说: “可以相信, 明天谁不能熟悉分形, 谁就不能被认为是科学上的文化人。”

- [1] H. E. Stanley, 物理学进展, 5-1(1985), 1.
- [2] H. Kesten, *Commun. Math. Phys.*, 74(1980), 41.
- [3] 汪子丹、龚昌德, 物理学进展, 10(1990), 1.
- [4] 黄立基等, 中国科学(A辑), 10(1988), 1075.
- [5] T. C. Li et al., *J. Phys. A*, 16(1983), 655.
- [6] 屈少华等, 物理学报, 40(1991), 169.
- [7] Bo-Ming Yu and Kai-Lun Yao, *Z. Phys. B*, 70(1988), 209.
- [8] Kai-Lun Yao and J. W. Halley, *Phys. Rev. B*, 29(1984), 4071.
- [9] B. Xing and K. L. Yao, *Z. Phys. B*, 78(1990), 485.
- [10] 李后强、程光斌编, 分形与分维, 四川教育出版社, (1990), 101.

1993 年第 3 期《物理》内容预告

知识和进展

对 21 世纪物理学的发展的一点猜想(彭桓武);
 粒子探测器大师乔治·恰帕克——1992 年诺贝尔物理学奖金获得者(马基茂);
 光致电磁辐射原理及应用(张希成等);
 有机固体与分子电子学(朱道本等);
 准晶体中的结构缺陷——相位子场面观(丁棣华);
 相对论性重离子碰撞与真空性质(赵维勤)。

物理学和经济建设

微波遥感的物理基础及其在农业上的应用(金钟辉);
 进入水处理的物理方法(曹昌年)。

实验技术

光谱测量中的相敏检测(冯 稷等);
 准分子激光蒸发——一种新型的镀膜技术(李贻杰)。

物理学史和物理学家

著名核物理学家戴传曾(唐廷友);
 爱因斯坦哲学思想发展的过程(阳兆祥)。